



TITLE:

# ポリ（キノキサリン-2,3-ジイル）の溶媒依存性らせん反転の機構解明

AUTHOR(S):

長田, 裕也

---

CITATION:

長田, 裕也. ポリ（キノキサリン-2,3-ジイル）の溶媒依存性らせん反転の機構解明. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2015, 2014: 86-86

ISSUE DATE:

2015-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/197617>

RIGHT:

ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の溶媒依存性らせん反転の機構解明

Elucidation of the Mechanism of Solvent-dependent Helix Inversion of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s

工学研究科 合成・生物化学専攻 有機設計学講座 長田裕也

【背景と目的】

我々はこれまでに、1,2-ジイソシアノベンゼン誘導体のリビング重合によって得られるポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の主鎖のらせん構造制御について研究を行ってきた。ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)類の側鎖としてキラル置換基を導入することで、主鎖に一方巻きらせん構造を誘起することができるほか、溶媒の違いに応じて主鎖の不斉らせん構造が完全に反転することなど、本骨格に特徴的な現象を見出している [参考論文1]。例えば、(R)-2-ブトキシメチル基を側鎖に有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)は、クロロホルム中において完全な右巻き構造をとるが、1,1,2-トリクロロエタン中では完全な左巻き構造をとる。この特徴を生かした不斉高分子配位子としての利用についても検討も行っており、溶媒系を変えることでキラル高分子配位子のらせんキラリティーを反転させ、両エナンチオマーを高いエナンチオ選択性で作り分けることにも成功している[参考論文2]。一方で、この溶媒依存性らせん反転に関するメカニズムは未だ明らかになっていない。本研究では、キラル側鎖を有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)の立体構造について予備的な検討を行った。

【検討内容】

(R)-2-ブトキシメチル基を側鎖に有するポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)40量体をモデルとして、分子動力学計算を行った。計算には Accelrys 社の Materials Studio を用いた。分子力場には、凝集系に対して高精度な分子計算を目的として最適化された第3世代力場として知られる COMPASS II 力場を用いた。

【結果・考察】

現在解析を進めている。

【研究計画】

今後、溶媒分子を含めた分子動力学シミュレーションによって、ポリ(キノキサリン-2,3-ジイル)主鎖らせん不斉の溶媒依存性について検討を行う予定である。

【発表論文】

なし

【参考論文】

- [1] (a) Yamada, T.; Nagata, Y.; Sugimoto, M. *Chem. Commun.* **2010**, 46, 4914-4916 (b) Nagata, Y.; Yamada, T.; Adachi, T.; Akai, Y.; Yamamoto, T.; Sugimoto, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 10104-10113.
- [2] Yamamoto, T.; Yamada, T.; Nagata, Y.; Sugimoto, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 7899-7901.